6.　反復法の物理的解釈

柳　沢　匡　史

（１）

常微分方程式の２点境界値問題の解法にはいろいろあるが、今回は差分近似を用いた反復法に着目し、解の収束の過程を調べてみた。

２階の常微分方程式の解を得るためには、位置と傾きなど少なくとも２つの条件が必要である。ここで、２つの境界の値から２階の微分方程式を解くものを２点境界値問題という。

さて、その２点境界値問題を計算機で解くとき、与えられた微分方程式を差分近似しその式を使って近似解を求めるもので反復法というものがある。

適当な x_i 初期値を定める

↓

差分近似した式から x_i (i=1,2,3...,n)を求める

例　差分式　$(x_{i+1}-2x_i+x_{i-1})/\Delta t^2 = cx_i$ を変形して

$x_i = (x_{i+1}+x_{i-1})/(\Delta t^2 c+2)$

この式を使って x_i を次々に求めていく

↓

x_i と前の x_i を比べて、値がほとんど動いていなければ計算終了

↓

反復法

ここで、簡単な例として、次のような２点境界値問題

$$\frac{dx^2}{dt^2} = cx \qquad (c：定数) \qquad ①$$

$$t=0 \quad x=0 \quad , \quad t=1 \quad x=1$$

を考える。　①を差分近似して

$$\frac{x_{i+1}-2x_i+x_{i-1}}{\Delta t^2} = cx_i \qquad ②$$

さて、この②式を使い色々なcの値に対する解を反復法で求めていく。解析解は全てのcで求めることができるのに対して近似解は $c<-27$、$c>-9$ のときには正しく収束し、$-9 \geqq c \geqq -27$ のときには発散してしまう。またcの絶対値が大きいほど収束が早くなる。これらの収束の過程を調べるために確率分布を用いて考えていく。

（２）準備

ここで、　$\frac{dV}{dx} = \frac{d^2x}{dt^2}$　を満たすようなVを考える。

「ポテンシャル（のようなもの）V」の働く空間の中で $\{X \mid x_1, x_2, x_3, ... x_N\}$ の組がとる確率は、

$$p(X) = Z^{-1}\exp\left[\Sigma\left\{-\frac{(x_i-x_{i-1})^2}{2\Delta t} - \Delta t V(x_i)\right\}\right]$$

Z：規格化定数

と考えられる。各点は、確率pがより大きくなるような状態に動いていくと考える。

（３）考察

この確率分布p（x）がパラメーターcによってどのように変化していくか調べてみた。ここで、xのいろいろな組を「状態」と呼ぶとする。差分式で反復を行なうと、一つ一つのプロセスで、より確率の大きな「状態」に動いていく。図１、図２は横軸はx_1，x_2、縦軸は確率密度である。

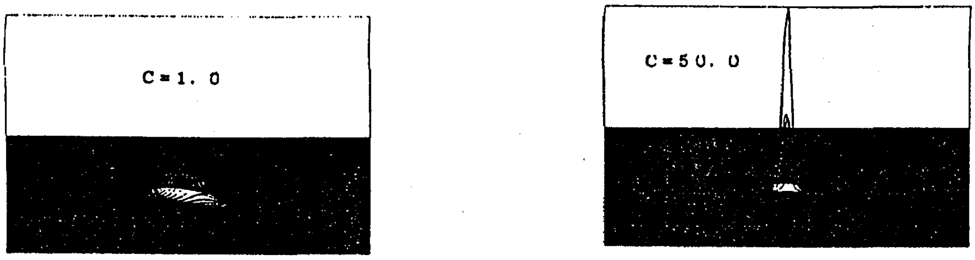
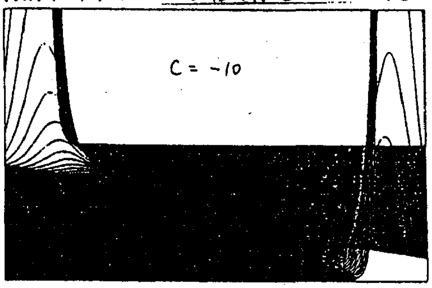


図 1

c＞－９，c＜－２７の範囲では、分布の形は図１のようになる。「状態」はただ一つの山の頂点に向かって移動していく。したがって、ただ一つの解に収束すると考えられる。



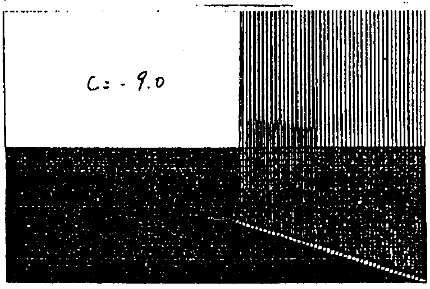


図 2

一方、－９≧c≧－２７の範囲では確率の大きい点は２つ存在する。（図２）したがって、初期値によってどちらかの山の頂点を目指して、解は発散する。

（４）物理的解釈

この考え方を物理的に解釈すると、空間内にポテンシャルV [*1] が働いているおり、その中で単位質量の物体を運動（ランダムウォークのような運動）させると、系の「状態」はより確率の大きい状態に移っていく。そして、定常状態となったときのxの組は微分方程式の解となっている。

もっと複雑な分布関数の形を調べることによって、反復解が複数ある場合の様子を調べることもできる。

＊１　このポテンシャルVは実際の物理のポテンシャルと符号が違うが、ここでは経路の方向は考慮していないので負号を付けなくても問題はない。
もし、実際の物理ポテンシャルを考えるとすると確率が最大になる経路は作用が最小になっている。（最小作用の原理）

（５）応用

この反復では、cの絶対値が小さいほど収束が遅い。もし、解の収束条件として相対誤差をとると、解に近づくスピードが遅いので計算機は収束したと判断して途中で計算を止めてしまう。いままで、微分方程式の反復法の収束条件としては相対的な判断しかできなかったが先ほどの確率pを用いると、収束したかどうかの判断が絶対的にできる。